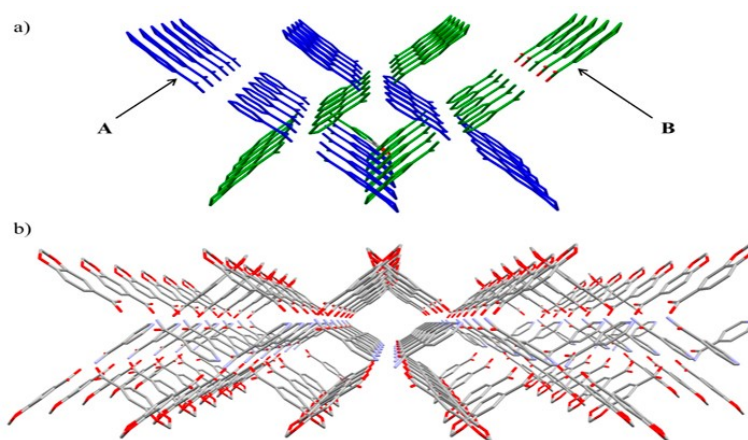


30/03/2020

Síntesi i caracterització de co-cristall, monòmer de Cu(II) i polímer de Cu(II)



En la ciència de materials són rellevants els enllaços d'hidrogens, atesa la seva força intermolecular, i les estructures de co-cristalls, arran de la seva versatilitat i poder de transformació física. Aquestes últimes es formen a partir dels primers gràcies a compostos com l'amina, ara bé, durant el procés de formació, la presència de metalls com ions metàl·lics de Cu (II) obre la pugna per obtenir co-cristalls, o bé compostos com monòmers i polímers, o bé ambdós.

Figura 1. Diferents perspectives de les cadenes del co-cristal

Pel que fa al disseny de nous materials orgànics i inorgànics, són de gran interès els que estableixen forces intermoleculars per la seva utilitat com a models biològics i en ciència de materials. Unes d'aquestes forces intermoleculars són els enllaços d'hidrogens, les característiques dels quals són útils en l'enginyeria de cristalls.

Els àcids carboxílics, formats, en part, per un grup carboxilat, poden formar enllaços d'hidrogens forts (O-H) quan es troben en presència d'altres molècules o compostos orgànics que tenen grups N-H (amines, amides, piridines) en la seva estructura. D'una banda, quan l'enllaç d'hidrogens es forma directament entre el O-H del grup carboxilat i el grup N-H sense presència de metalls, es formen els co-cristalls. La importància d'aquests rau en la capacitat que mostren

per modificar propietats físiques com el punt de fusió, la solubilitat i la conductivitat, entre d'altres.

D'altra banda, durant la formació d'aquests compostos (co-cristalls), si hi ha presència d'ions metàl·lics com Cu (II), té lloc la competició per la formació de co-cristalls o complexes, també anomenades compostos de coordinació. Aquest és el procediment que descriu el present treball que, en particular, dona a conèixer els tres compostos següents: el co-cristall, el monòmer de Cu (II) i el polímer de Cu (II). En referència a l'àcid carboxílic, en aquest cas, correspon al piperonilic (HPip) i l'amina és la isocnicotinamida (Isn).

En una síntesi de la recerca objecte d'aquest article, s'observa la competició de la formació d'un co-cristall i un monòmer de Cu (II). En una altra síntesi, la competició entre la formació d'un monòmer i un polímer. La investigació exposa que s'ha pogut dissenyar una síntesi per obtenir el co-cristall i el monòmer per separat, però no ha estat possible trobar un mètode de síntesi per aïllar només el polímer. La separació del polímer de monòmer s'ha fet mecànicament, ja que aquests dos productes tenen diferent color, el monòmer (violeta) i el polímer (verd). Ambdós compostos s'han obtingut en proporció 1.5:1, respectivament.

Tots els compostos s'han caracteritzat per difracció de raig-X en monocristall, cosa que ha permès analitzar i estudiar les estructures moleculars i supramoleculars, per espectroscòpia IR i també s'han realitzat anàlisis elementals. A més, el co-cristall s'ha caracteritzat per ressonància magnètica nuclear de ^1H i ^{13}C i el monòmer i el polímer; per espectroscòpia UV-Vis.

Finalment, pels tres compostos s'han estudiat les superfícies de Hirshfeld i s'han calculat les energies reticulars. En aquests estudis, el valor de l'energia reticular calculada és gran, atès el gran nombre d'interaccions intermoleculars observades. S'ha demostrat també la gran importància de l'amina en les interaccions intermoleculars (grup N-H) i la menor importància de l'àcid carboxílic (grup O-H) perquè forma interaccions molt febles (Forces de London).

Josefina Pons

Departament de Química

Universitat Autònoma de Barcelona

Josefina.Pons@uab.cat

Referències

"Isonicotinamide-Based Compounds: From Cocrystal to Polymer" Francisco Sánchez-Férez, Daniel Ejarque, Teresa Calvet, Mercè Font-Bardía, Josefina Pons, *Molecules*, 2019,24,4169

- 1) B.-H. Ye, M.-L. Tong, X.-M. Chen, *Coord. Chem. Rev.* 2005, 249, 545-565.
- 2) A.R. Choudhury, G.R. Desiraju, A.G. Dikundwar, R. Dubey, N. Duggirala, P.P. Ghogale, S. Ghosh, P.K. Goswami, N.R. Goud, R.R.K.R. Jetti, *Cryst. Growth Des.* 2012, 12, 2147-2152.
- 3) F. Sánchez-Férez, M. Guerrero, J.A. Ayllón, T. Calvet, M. Font-Bardía, J. Giner Planas, J. Pons, *Inorg. Chim. Acta* 2019, 487, 295-306.
- 4) J. Soldevila-Sanmartín, J.A. Ayllón, T. Calvet, M. Font-Bardía, C. Domingo, J. Pons, *Inorg. Chem. Commun.* 2016, 71, 90-93.
- 5) A. Mukherjee, *Cryst. Growth Des.* 2015, 15, 3076-3085.

[View low-bandwidth version](#)